## 明細書

フォークト線形の分解による高速ライン・バイ・ライン計算方法およびプログラム

## 技術分野

[0001] 本発明は大気の観測において、気体分子の吸収係数スペクトルの高速ライン・バイ・ライン計算に関する。

#### 背景技術

- [0002] 地球の大気は太陽からの電磁波を受ける一方で、自身も赤外領域を中心とする電磁波を宇宙空間に放出している。そして、これらの電磁波は大気に含まれる気体分子や雲、エアロゾルなどにより吸収、放射、散乱などの相互作用を受ける。こうした大気との相互作用によってもたらされる電磁波のスペクトル分布の変化(これを理論的に求める計算を放射伝達計算という)を地上、航空機、あるいは人工衛星に搭載されたセンサで測定することにより、気温、気圧や微量な気体成分の濃度などを分析することができる。
- [0003] 大気の放射伝達計算ではライン・バイ・ライン計算と呼ばれる手法が用いられているが、ライン・バイ・ライン計算は計算量が膨大である。このため、計算時間が非常に長くパーソナルコンピュータ等で広いスペクトル範囲にわたって高速に計算することは実質的に困難である。また、このような問題を回避する方法としてテーブルルックアップなどを利用して事前にライン・バイ・ライン計算を行ったデータを利用する方法があるが、これは大容量データファイルを必要とする欠点を有していた。また事前計算を必要としない他のアルゴリズムでもライン・バイ・ライン計算の20倍程度の計算速度にとどまっていた。

非特許文献1: Akihiro Uchiyama, "Line-By-Line Computation Of The Atmospheric Absorption Spectrum Using The Decomposed VOIGT Line Shape" J. Quant. Spectrosc. Radiant. Transfer Vol. 47, No6, pp.521-532, 1992.

#### 発明の開示

発明が解決しようとする課題

- [0004] 上述のような問題から、高速でライン・バイ・ライン計算ができる計算方法が望まれて おり、本発明はこのような計算方法およびプログラムを提供する。
  - 課題を解決するための手段
- [0005] 本発明はライン・バイ・ライン計算に用いるフォークト関数の近似計算方法であって、該方法は、以下の各段階を含む。
  - (1)フォークト関数の対象範囲を、フォークト関数のピーク近傍の第1の範囲および第 1の範囲に含まれない裾部分に分けて、第1の範囲を3次関数で代替し、第1の所定 の間隔ごとに該3次関数と裾部分のフォークト関数の値及び微分値を計算し、前記3 次関数と前記フォークト関数の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接 続する段階と、
  - (2)複数の吸収線について前記(1)の結果を足し合わせる段階と、
  - (3)前記(2)の結果を前記第1の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び微分値を計算する段階と、
  - (4)前記第1の範囲をピーク近傍の第2の範囲と第2の範囲に含まれない裾部分に分けて、「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の該第2の範囲を3次関数で代替し、第2の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分の該「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の値及び微分値を計算する段階と、
  - (5)前記3次関数と前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接続する段階と、
  - (6)複数の吸収線について前記(4)及び(5)の結果を前記(3)の結果に足し合わせる段階と、
  - (7)前記(6)の結果を前記第2の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び 微分値を計算する段階と、
  - (8)前記第2の範囲において複数の吸収線について「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の値を前記(7)の結果に足し合わせる段階。

以上の段階を用いる方法により、フォークト関数を3次関数を用いて高速に計算することができる。

[0006] これに加えて第3の所定の間隔になるまで前記(5)ないし(8)に記載された段階を

1回以上繰り返すこともできる。これによって計算間隔の小さい詳細な結果を得ることができる。このような第1〜第3の所定の間隔は以下のように求める。

[0007] 最も広い幅のサブ関数に対する第1の所定の間隔は、 $j^{kmax}$ d  $\nu$  である。ここで、jは所定の間隔に分割にするときの所定の分割数であり、1桁の自然数、d  $\nu$  は波数の増分、kmaxは $j^{kmax+2}$ pd  $\nu$   $\leq$  Vmaxを満たす自然数である。ただし、Vmax は 吸収線中心からの計算範囲、pは計算精度を制御する自然数(p=1,2,3)である。

最も詳細な第3の所定の間隔は、 $j^{kmin}$ d  $\nu$  である。ここで、jは1桁の自然数であり2〜6程度の値である。  $d\nu$  は波数の増分、kminは、 $j^{kmin}$ pd  $\nu \le \alpha$  ( $\alpha$  は $\gamma$  / 4程度)を満たす最大の非負の整数である(存在しない場合は0とする)。ただし、 $\gamma$  は吸収線の半値幅の近似値、pは計算精度を制御する自然数(p=1,2,3)である。

第2の所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項1ないし4のいずれかに記載の方法。

第k-kmin+1番目に狭い幅のサブ関数に対して所定の間隔は、 $j^k$ d $\nu$ である。ここで、jは1桁の自然数、 $d\nu$ は波数の増分、kはkmin $\leq$ k<kmaxである。

[0008] 4分割の補間に関しては、前記補間は、jを4とし、補間区間 $(x_0, x_1)$ において $x_0, x_1$  での関数値 $y_0, y_1$ 及び関数微分値 $y_0', y_1'$ 、以下の(1)式は関数値の補間式、(2)式 は関数微分値の補間式を用いて、 $\epsilon$  を非負の小数として計算する [数1]

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \end{pmatrix} = \frac{1}{64} \begin{pmatrix} 54 - 6\varepsilon & 10 + 6\varepsilon & 9(1 - \varepsilon) & -3(1 - \varepsilon) \\ 32 & 32 & 8(1 - \varepsilon) & -8(1 - \varepsilon) \\ 10 + 6\varepsilon & 54 - 6\varepsilon & 3(1 - \varepsilon) & -9(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0)y_0' \\ (x_1 - x_0)y_1' \end{pmatrix}$$
 (1)

[数2]

$$\begin{pmatrix} y_a' \\ y_b' \\ y_c' \end{pmatrix} = \frac{1}{16(x_1 - x_0)} \begin{pmatrix} -18 + 2\varepsilon & 18 - 2\varepsilon & 3(1 - \varepsilon) & -5(1 - \varepsilon) \\ -24 + 8\varepsilon & 24 - 8\varepsilon & -4(1 - \varepsilon) & -4(1 - \varepsilon) \\ -18 + 2\varepsilon & 18 - 2\varepsilon & -5(1 - \varepsilon) & 3(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0) y_0' \\ (x_1 - x_0) y_1' \end{pmatrix}$$
 (2)

[0009] また5分割の補間に関しては、jを5とし、補間区間 $(x_0, x_1)$ において $x_0, x_1$ での関数

値 $y_0$ 、 $y_1$ 及び関数微分値 $y_0$ 、 $y_1$ 、以下の(3)式は関数値の補間式、(4)式は関数微分値の補間式を用いて、 $\epsilon$  を非負の小数として計算する。

[数3]

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \\ y_d \end{pmatrix} = \frac{1}{125} \begin{pmatrix} 112 - 12\varepsilon & 13 + 12\varepsilon & 16(1 - \varepsilon) & -4(1 - \varepsilon) \\ 81 - 6\varepsilon & 44 + 6\varepsilon & 18(1 - \varepsilon) & -12(1 - \varepsilon) \\ 44 + 6\varepsilon & 81 - 6\varepsilon & 12(1 - \varepsilon) & -18(1 - \varepsilon) \\ 13 + 12\varepsilon & 112 - 12\varepsilon & 4(1 - \varepsilon) & -16(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0)y_0' \\ (x_1 - x_0)y_1' \end{pmatrix}$$
(3)

[数4]

$$\begin{pmatrix} y'_a \\ y'_b \\ y'_c \\ y'_d \end{pmatrix} = \frac{1}{25(x_1 - x_0)} \begin{pmatrix} -24 - \varepsilon & 24 + \varepsilon & 8(1 - \varepsilon) & -7(1 - \varepsilon) \\ -36 + 11\varepsilon & 36 - 11\varepsilon & -3(1 - \varepsilon) & -8(1 - \varepsilon) \\ -36 + 11\varepsilon & 36 - 11\varepsilon & -8(1 - \varepsilon) & -3(1 - \varepsilon) \\ -24 - \varepsilon & 24 + \varepsilon & -7(1 - \varepsilon) & 8(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0) y'_0 \\ (x_1 - x_0) y'_1 \end{pmatrix}$$
(4)

このような計算によって高速に補間ができる。

[0010] またフォークト関数をK(x,y)とし、吸収線のフォークト線形からのずれがK(x,y)+f(x)であるとき、

[数5]

$$\widetilde{K}(x,y) = AK(x,y) + Bf(x),$$

[数6]

$$\frac{\partial K(x,y)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化する方法を提供する。

[0011] さらに、フォークト線形からのずれがK(x,y)f(x)の形であるとき、 「数7]

$$\widetilde{K}(x,y) = K(x,y) f(x)$$

[数8]

$$\frac{\partial \widetilde{K}(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} f(x) + K(x,y) \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化する方法を提供する。

[0012] さらにラインミキシング補正では、

[数9]

$$\widetilde{K}(x,y) = AK(x,y) + BL(x,y),$$

「数10]

$$\frac{\partial \widetilde{K}(x,y)}{\partial x} = -2\left[ (Ax + By)K(x,y) - (Ay - Bx)L(x,y) - \frac{B}{\sqrt{\pi}} \right],$$

ここでL(x,y)は次式で定義される、複素数z=x+iyの関数w(z)の虚数成分である(実数部分はフォークト関数)。

「数11]

$$w(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z - t} dt = \exp(-z^2) erfc(-iz) = K(x, y) + iL(x, y)$$

(erfc(z)は複素相補誤差関数)

で置き換えることによる高速計算方法を提供する。

[0013] さらにこれら上記記載の方法をプログラムとして実装することによって本発明の方法 を実行する装置を提供することができる。

図面の簡単な説明

[0014] [図1]図1はフォークト関数を概略的な図である。

[図2]図2は本発明の方法において、フォークト関数をサブ関数に分解する様子を示した図である。

「図3]図3はフォークト関数と3次関数の誤差を示した図である。

符号の説明

[0015] 1 フォークト関数

- 2 第1の範囲
- 3 裾部分
- 4 第1の範囲に含まれる関数
- 5 第1の範囲に含まれない部分

# 発明を実施するための最良の形態

- [0016] 以下に本発明の実施例を説明する。図1はフォークト関数1の形を示した図である。本発明ではまずこのフォークト関数1をサブ関数に分ける。該サブ関数はピーク近傍の第1の範囲2と該第1の範囲2以外の裾部分3であり、該第1の範囲1を3次関数で代替し、該第1の範囲に含まれない部分、つまり裾部分をフォークト関数で計算する
- [0017] 図2に詳細な計算方法を示した。図2(a)に示したようにフォークト関数1のうち第1 の範囲2に含まれる関数4を3次関数で代替する。このとき3次関数とフォークト関数 の接続点における両関数の微分値が一致し滑らかに接続するよう3次関数を決定する。また該第1の範囲に含まれない部分5はフォークト関数で計算する。計算は第1の 所定の間隔で行い、これは波数の増分をd  $\nu$  として、 $j^{kmax}$  d  $\nu$  である。ここでjは1桁の自然数、kmax は、 $j^{kmax+2}$  pd  $\nu$   $\leq$  Vmax を満たす最大の自然数である。Vmax は 25cm -1

を利用する。また、通常jは2〜6程度の数値が与えられ、好適な値は4である。またV maxは吸収線中心からの計算範囲、pは計算精度を制御する自然数であり、好適に はpの値は1、2、3である。

- [0018] このようにして計算した結果を複数の吸収線について足し合わせる。この段階では 第1の所定の間隔で計算した粗い結果となっている。
- [0019] 次に第1の所定の間隔より小さい間隔で未評価点を計算する。つまり第1の所定の間隔を4分割する間隔で未評価点の補間を行う。この分割点の計算は以下の補間式によって行う。

補間区間 $(x_0, x_1)$ において $x_0, x_1$ での関数値を $y_0, y_1$ 及び関数微分値 $y_0, y_1$ をとして以下の2つの式、

[数12]

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \end{pmatrix} = \frac{1}{64} \begin{pmatrix} 54 - 6\varepsilon & 10 + 6\varepsilon & 9(1 - \varepsilon) & -3(1 - \varepsilon) \\ 32 & 32 & 8(1 - \varepsilon) & -8(1 - \varepsilon) \\ 10 + 6\varepsilon & 54 - 6\varepsilon & 3(1 - \varepsilon) & -9(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0)y_0' \\ (x_1 - x_0)y_1' \end{pmatrix}$$
(1)

[数13]

$$\begin{pmatrix} y_a' \\ y_b' \\ y_c' \end{pmatrix} = \frac{1}{16(x_1 - x_0)} \begin{pmatrix} -18 + 2\varepsilon & 18 - 2\varepsilon & 3(1 - \varepsilon) & -5(1 - \varepsilon) \\ -24 + 8\varepsilon & 24 - 8\varepsilon & -4(1 - \varepsilon) & -4(1 - \varepsilon) \\ -18 + 2\varepsilon & 18 - 2\varepsilon & -5(1 - \varepsilon) & 3(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0) y_0' \\ (x_1 - x_0) y_1' \end{pmatrix}$$
 (2)

により求める。ここで  $\varepsilon$  は非負の小数である。この  $\varepsilon$  に関しては、図3に示したようにフォークト関数と3次関数が補間点 $\mathbf{x}_0$ 、 $\mathbf{x}_1$ で一致しても、補間点の間の領域では曲線の曲率が異なるため関数値に誤差が生じる。  $\varepsilon$  =0でも十分な精度が得られるが、3次関数の曲率を  $\varepsilon$  の値を変化させることによって調節することにより誤差をさらに半分程度に抑えることが可能である。この2つの式により前記第1の所定の間隔の補間区間( $\mathbf{x}_0$ 、 $\mathbf{x}_1$ )を4分割する点の関数値 $\mathbf{y}_a$ 、 $\mathbf{y}_b$ 、 $\mathbf{y}_c$ 、およびその微分値 $\mathbf{y}_a$ 、 $\mathbf{y}_b$ 、 $\mathbf{y}_c$  を求めることができる。ここで $\mathbf{x}_0$ 、 $\mathbf{x}_1$ は本発明においては波数である。前記  $\varepsilon$  の調整は、計算スペクトル範囲のうちの一部の狭いスペクトル範囲において、 $\varepsilon$  を変化させた場合の計算結果を通常のライン・バイ・ライン法の計算結果と比較しておこなう。

[0020] また前記第1の所定の間隔を5分割する補間も本発明では提案する。5分割する補間式は、

[数14]

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \\ y_d \end{pmatrix} = \frac{1}{125} \begin{pmatrix} 112 - 12\varepsilon & 13 + 12\varepsilon & 16(1 - \varepsilon) & -4(1 - \varepsilon) \\ 81 - 6\varepsilon & 44 + 6\varepsilon & 18(1 - \varepsilon) & -12(1 - \varepsilon) \\ 44 + 6\varepsilon & 81 - 6\varepsilon & 12(1 - \varepsilon) & -18(1 - \varepsilon) \\ 13 + 12\varepsilon & 112 - 12\varepsilon & 4(1 - \varepsilon) & -16(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0)y_0' \\ (x_1 - x_0)y_1' \end{pmatrix}$$
(3)

[数15]

WO 2005/033640 8 PCT/JP2004/012301

$$\begin{pmatrix} y'_{a} \\ y'_{b} \\ y'_{c} \\ y'_{d} \end{pmatrix} = \frac{1}{25(x_{1} - x_{0})} \begin{pmatrix} -24 - \varepsilon & 24 + \varepsilon & 8(1 - \varepsilon) & -7(1 - \varepsilon) \\ -36 + 11\varepsilon & 36 - 11\varepsilon & -3(1 - \varepsilon) & -8(1 - \varepsilon) \\ -36 + 11\varepsilon & 36 - 11\varepsilon & -8(1 - \varepsilon) & -3(1 - \varepsilon) \\ -24 - \varepsilon & 24 + \varepsilon & -7(1 - \varepsilon) & 8(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{0} \\ y_{1} \\ (x_{1} - x_{0}) y'_{0} \\ (x_{1} - x_{0}) y'_{1} \end{pmatrix}$$
(4)

である。式中の各文字は前記4分割の場合と同様である。またy<sub>d</sub>、y<sub>d</sub>、はそれぞれ関数値および微分値であることは当業者には明らかである。ここで上記記載の補間式は第1の所定の間隔だけでなく他の所定の間隔に対しても用いることができ、これは当業者には明白である。

- [0021] 以上のようにして各補間点を計算する。次に図2(b)に示したように前記第1の範囲内においてさらにピーク近傍の領域を補間により計算する。前記記載と同様に該第1の範囲内においてピーク近傍を第2の範囲6とし、該第2の範囲6に含まれない裾部分とに分け、第2の範囲を第2の3次関数で、該第2の範囲に含まれない裾部分を「フォークト関数と第1の3次関数との差の関数」7でそれぞれ表す。該第2の3次関数は新たな3次関数と第1の3次関数の差の関数である。ここで該「フォークト関数と第1の3次関数との差の関数」を以後単に「差の関数」と称する。該第2の3次関数と「差の関数」7の接続点では前記記載と同様に関数値および微分値が一致することを条件として接続する。
- [0022] このように関数を接続した後、第2の範囲において第2の所定の間隔で関数値及び 微分値を計算する。この第2の所定の間隔は第1の所定の間隔より狭い間隔でありこれは以下の式によって計算される。

第k—kmin+1番目に狭い幅のサブ関数に対して所定の間隔は、 $j^k d \nu$  である。ここで、jk1桁の自然数、 $d \nu$  は波数の増分、 $kkmin \leq k < kmax$ である。

またこの計算を全ての吸収線について行う。さらにこれら計算した各点間の補間を 行う。補間は前記(1)と(2)または(3)と(4)の式を用いる。

[0023] ここで、前記第2の範囲に含まれない裾部分の「差の関数」とこれに滑らかに接続する第2の範囲の3次関数を複数の吸収線ついて計算する上の方法を述べたがこの代わりに、第2の範囲に含まれない裾部分のフォークト関数とこれに滑らかに接続する3次関数を複数の吸収線について計算した後で第1の3次関数を第1の範囲全体から

複数の吸収線について差し引く方法を用いることも可能である。

- [0025] さらにピーク近傍を3次関数で代替し、裾部分を「差の関数」として前記第2の間隔より狭い第3の所定の間隔で計算をする。該第3の所定の間隔は以下の式で表される。

第3の所定の間隔は、 $j^{kmin}$ d  $\nu$  である。ここで、jは1桁の自然数、 $d\nu$  は波数の増分、kminは、 $j^{kmin}$ pd  $\nu \leq \alpha$  を満たす最大の非負の小数である(存在しない場合は0とする)。ただし、 $\alpha$  は  $\gamma$  /4程度の値 ( $\gamma$  は吸収線の半値幅の近似値)、pは計算精度を制御する自然数(p=1,2,3)である。

- [0026] 以上のような段階によってフォークト関数を精度良く、かつ高速に計算することができる。ここで実際の二酸化炭素等のフォークト関数と若干のずれを生じることが知られており、このずれに対して補正を行う方法が知られている。本発明の方法はこれらの補正に対しても適用できる。この補正に関して次に説明する。
- [0027] 一般的な線形補正を最初に説明する。

フォークト関数をK(x,y)と表わす。フォークト線形からのずれがK(x,y)+f(x)の形で表わ される場合、置き換える関数を、

[数16]

 $\tilde{K}(x, y)$ 

として、

[数17]

 $\widetilde{K}(x, y) = AK(x, y) + Bf(x)$ 

[数18]

$$\frac{\partial \widetilde{K}(x,y)}{\partial x} = A \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} + B \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化手法を適用できる。同様に、フォークト線形からのずれがK(x,y)f(x)の形で表わせる場合は、

[数19]

$$\tilde{K}(x, y) = K(x, y) f(x)$$

[数20]

$$\frac{\partial \widetilde{K}(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} f(x) + K(x,y) \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化手法を適用できる。

[0028] 上記の補正方法を具体的な実施例で説明すると、サブローレンツィアン補正に対しては、

[数21]

[数22]

$$\frac{\partial K(x,y)}{\partial x}$$

はそれぞれ、

[数23]

$$\widetilde{K}(x, y) = K(x, y) A \exp(-B|x|)$$

[数24]

$$\frac{\partial \tilde{K}(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} A \exp(-B |x|) + K(x,y) \left[-\operatorname{sgn}(x) A B \exp(-B |x|)\right]$$

となる。ここでA、Bは補正係数である。またsgn(x)は符号関数であることは当業者には 既知である。

[0029] ラインミキシング補正に関しては次の関係、

[数25]

$$\frac{\partial K(x,y)}{\partial x} = 2[yL(x,y) - xK(x,y)]$$

[数26]

$$\frac{\partial L(x,y)}{\partial x} = 2\left[xL(x,y) + yK(x,y) - \frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]$$

が成り立つことから、

[数27]

[数28]

$$\frac{\partial K(x,y)}{\partial x}$$

はそれぞれ、

[数29]

$$\tilde{K}(x,y) = AK(x,y) + BL(x,y),$$

[数30]

$$\frac{\partial \widetilde{K}(x,y)}{\partial x} = -2\left[ (Ax + By)K(x,y) - (Ay - Bx)L(x,y) - \frac{B}{\sqrt{\pi}} \right],$$

WO 2005/033640 12 PCT/JP2004/012301

である。

ここでL(x,y)は次式で定義される、複素数z=x+iyの関数w(z)の虚数成分である。実数部分はフォークト関数である。

[数31]

$$w(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z - t} dt = \exp(-z^2) erfc(-iz) = K(x, y) + iL(x, y)$$

erfc(z)は複素相補誤差関数である。

[0030] 以上のように本発明の計算方法によってフォークト関数を用いたライン・バイ・ライン 計算を精度良く高速に実行することができる。さらにこれらの方法をコンピュータプログラムとして実装することにより、具体的な装置を実現することができる。このプログラムは例えばパーソナルコンピュータ上で動作するスタンドアロン型のプログラムでも良い。また他のソフトウエアのプラグインとして実現することもできる。

## 請求の範囲

- [1] ライン・バイ・ライン計算に用いるフォークト関数の近似計算方法であって、該方法は、
  - (1)フォークト関数の対象範囲を、フォークト関数のピーク近傍の第1の範囲および第 1の範囲に含まれない裾部分に分けて、第1の範囲を3次関数で代替し、第1の所定 の間隔ごとに該3次関数と裾部分のフォークト関数の値及び微分値を計算し、前記3 次関数と前記フォークト関数の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接 続する段階と、
  - (2)複数の吸収線について前記(1)の結果を足し合わせる段階と、
  - (3)前記(2)の結果を前記第1の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び微分値を計算する段階と、
  - (4)前記第1の範囲をピーク近傍の第2の範囲と第2の範囲に含まれない裾部分に分けて、「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の該第2の範囲を3次関数で代替し、第2の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分の該「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の値及び微分値を計算する段階と、
  - (5)前記3次関数と前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接続する段階と、
  - (6)複数の吸収線について前記(4)及び(5)の結果を前記(3)の結果に足し合わせる段階と、
  - (7)前記(6)の結果を前記第2の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び 微分値を計算する段階と、
  - (8)前記第2の範囲において複数の吸収線について「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の値を前記(7)の結果に足し合わせる段階と、を有する方法。
- [2] (9)最小単位の間隔になるまで間隔を狭めながら補間により関数値、微分値を計算する段階を繰り返す請求項1に記載の方法。
- [3] 第3の所定の間隔になるまで前記(4)ないし(7)に記載された段階を1回以上繰り返す請求項1に記載の方法。

- [4] 前記所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項1に記載の方法。 最も広い幅のサブ関数に対する第1の所定の間隔は、 $\int_{-\infty}^{kmax} d \nu$ である。ここで、 $\int_{-\infty}^{kmax} d \nu$ である。
- [5] 前記所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項3に記載の方法。 前記最も詳細な第3の所定の間隔は、 $j^{kmin}$ d  $\nu$  である。ここで、jは1桁の自然数、d  $\nu$  は波数の増分、kminは、 $j^{kmin}$ pd  $\nu \le \alpha$  ( $\alpha$  は $\gamma$  / 4程度)を満たす最大の非負の整数である。ただし、 $\gamma$  は吸収線の半値幅の近似値、pは計算精度を制御する自然数である。
- [6] 前記第2の所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項1に記載の方法。 第k-kmin+1番目に狭い幅のサブ関数に対して所定の間隔は、j<sup>k</sup>d $\nu$  である。ここで、jは1桁の自然数、d $\nu$  は波数の増分、kはkmin $\leq k$ <kmaxである。
- [7] 前記補間は、jを4として補間区間 $(x_0, x_1)$ において $x_0, x_1$ での関数値 $y_0, y_1$ 及び関数微分値 $y_0, y_1$ を用いて、以下の(1)式は関数値の補間式、(2)式は関数微分値の補間式、 $\epsilon$ を非負の小数として計算する請求項1ないし3のいずれかに記載の方法。

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \end{pmatrix} = \frac{1}{64} \begin{pmatrix} 54 - 6\varepsilon & 10 + 6\varepsilon & 9(1 - \varepsilon) & -3(1 - \varepsilon) \\ 32 & 32 & 8(1 - \varepsilon) & -8(1 - \varepsilon) \\ 10 + 6\varepsilon & 54 - 6\varepsilon & 3(1 - \varepsilon) & -9(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0)y_0' \\ (x_1 - x_0)y_1' \end{pmatrix}$$
(1)

$$\begin{pmatrix} y_a' \\ y_b' \\ y_c' \end{pmatrix} = \frac{1}{16(x_1 - x_0)} \begin{pmatrix} -18 + 2\varepsilon & 18 - 2\varepsilon & 3(1 - \varepsilon) & -5(1 - \varepsilon) \\ -24 + 8\varepsilon & 24 - 8\varepsilon & -4(1 - \varepsilon) & -4(1 - \varepsilon) \\ -18 + 2\varepsilon & 18 - 2\varepsilon & -5(1 - \varepsilon) & 3(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0) y_0' \\ (x_1 - x_0) y_1' \end{pmatrix}$$
(2)

[8] 前記補間は、jを5として補間区間 $(x_0, x_1)$ において $x_0, x_1$ での関数値 $y_0, y_1$ 及び関数微分値 $y_0, y_1$ を用いて、以下の(3)式は関数値の補間式、(4)式は関数微分値の補間式、(4)式は関数微分値の補間式、(4)式は関数微分値の

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \\ y_d \end{pmatrix} = \frac{1}{125} \begin{pmatrix} 112 - 12\varepsilon & 13 + 12\varepsilon & 16(1 - \varepsilon) & -4(1 - \varepsilon) \\ 81 - 6\varepsilon & 44 + 6\varepsilon & 18(1 - \varepsilon) & -12(1 - \varepsilon) \\ 44 + 6\varepsilon & 81 - 6\varepsilon & 12(1 - \varepsilon) & -18(1 - \varepsilon) \\ 13 + 12\varepsilon & 112 - 12\varepsilon & 4(1 - \varepsilon) & -16(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0)y_0' \\ (x_1 - x_0)y_1' \end{pmatrix}$$
(3)

$$\begin{pmatrix} y'_a \\ y'_b \\ y'_c \\ y'_d \end{pmatrix} = \frac{1}{25(x_1 - x_0)} \begin{pmatrix} -24 - \varepsilon & 24 + \varepsilon & 8(1 - \varepsilon) & -7(1 - \varepsilon) \\ -36 + 11\varepsilon & 36 - 11\varepsilon & -3(1 - \varepsilon) & -8(1 - \varepsilon) \\ -36 + 11\varepsilon & 36 - 11\varepsilon & -8(1 - \varepsilon) & -3(1 - \varepsilon) \\ -24 - \varepsilon & 24 + \varepsilon & -7(1 - \varepsilon) & 8(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0) y'_0 \\ (x_1 - x_0) y'_1 \end{pmatrix}$$
(4)

[9] フォークト関数をK(x,y)とし、吸収線のフォークト線形からのずれがK(x,y)+f(x)であるとき、

を

$$\widetilde{K}(x, y) = AK(x, y) + Bf(x)$$

 $\frac{\partial K(x,y)}{\partial x}$ 

を

$$\frac{\partial \widetilde{K}(x,y)}{\partial x} = A \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} + B \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化する請求項1ないし8に記載の方法。

[10] フォークト関数をK(x,y)とし、吸収線のフォークト線形からのずれK(x,y)f(x)がであるとき、

を

$$\tilde{K}(x,y) = K(x,y) f(x),$$

$$\frac{\partial K(x,y)}{\partial x}$$

を

$$\frac{\partial \widetilde{K}(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} f(x) + K(x,y) \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによって高速化する請求項1ないし8に記載の方法。

[11] サブローレンツィアン補正について、

$$\widetilde{K}(x,y) = K(x,y) A \exp(-B|x|),$$

および

$$\frac{\partial \widetilde{K}(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} A \exp(-B |x|) + K(x,y) \left[-\operatorname{sgn}(x) A B \exp(-B |x|)\right]$$

を利用して高速化する請求項1ないし10に記載の方法。

[12] ラインミキシング補正について、以下に表す式で置き換えることによって高速化する 請求項1ないし10に記載の方法。

を

$$\widetilde{K}(x,y) = AK(x,y) + BL(x,y),$$

$$\frac{\partial K(x,y)}{\partial x}$$

を

$$\frac{\partial \tilde{K}(x,y)}{\partial x} = -2\left[ (Ax + By)K(x,y) - (Ay - Bx)L(x,y) - \frac{B}{\sqrt{\pi}} \right],$$

ここでL(x,y)は次式で定義される、複素数z=x+iyの関数w(z)の虚数成分である(実数部分はフォークト関数)。

$$w(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z - t} dt = \exp(-z^2) erfc(-iz) = K(x, y) + iL(x, y)$$

(erfc(z)は複素相補誤差関数)

- [13] ライン・バイ・ライン計算に用いるフォークト関数の近似計算プログラムであって、該 プログラムは、
  - (1)フォークト関数の対象範囲を、フォークト関数のピーク近傍の第1の範囲および第1の範囲に含まれない裾部分に分けて、第1の範囲を3次関数で代替し、第1の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分のフォークト関数の値及び微分値を計算し、前記3次関数と前記フォークト関数の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接続する段階と、
  - (2)複数の吸収線について前記(1)の結果を足し合わせる段階と、
  - (3)前記(2)の結果を前記第1の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び微分値を計算する段階と、
  - (4)前記第1の範囲をピーク近傍の第2の範囲と第2の範囲に含まれない裾部分に分けて、「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の該第2の範囲を3次関数で代替し、第2の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分の該「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の値及び微分値を計算する段階と、
  - (5)前記3次関数と前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の接続点において、両関数の値及び微分値を用いて接続する段階と、
  - (6)複数の吸収線について前記(4)及び(5)の結果を前記(3)の結果に足し合わせる段階と、
  - (7)前記(6)の結果を前記第2の所定の間隔より狭い間隔で、補間により関数値及び 微分値を計算する段階と、

WO 2005/033640 18 PCT/JP2004/012301

- (8)前記第2の範囲において複数の吸収線について「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の値を前記(7)の結果に足し合わせる段階と、を有するプログラム。
- [14] 最小単位の間隔になるまで間隔を狭めながら補間により関数値、微分値を計算する段階を繰り返す請求項13に記載のプログラム。
- [15] 第3の所定の間隔になるまで前記(4)ないし(7)に記載された段階を1回以上繰り返す請求項13に記載のプログラム。

#### 補正書の請求の範囲

[2004年11月30日 (30. 11. 04) 国際事務局受理:出願当初の請求の範囲1-15は 補正された請求の範囲1-15に置き換えられた。(6頁)]

- [1] (補正後)多数の重なり合う吸収線のライン・バイ・ライン計算の高速化方法であって、該方法は、
  - (1)吸収線の形状を表わすフォークト関数の対象範囲を、フォークト関数のピーク近傍の第1の範囲および第1の範囲に含まれない裾部分に分けて、第1の範囲を、前記フォークト関数との接続点において、前記フォークト関数と関数の値及び微分値が一致する3次関数で代替し、第1の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分のフォークト関数の値及び微分値を計算する段階と、
  - (2)複数の吸収線について前記(1)の結果を足し合わせる段階と、
  - (3)前記(2)の結果を補間して前記第1の所定の間隔より狭い第2の所定の間隔で関数値及び微分値を計算する段階と、
  - (4)前記第1の範囲をピーク近傍の第2の範囲と第2の範囲に含まれない裾部分に分けて、「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の該第2の範囲を、前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」との接続点において、前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の関数の値及び微分値が一致する第2の3次関数で代替し、前記第2の所定の間隔ごとに該第2の範囲を代替した該第2の3次関数と裾部分の該「フォークト関数と前記第2の3次関数の差の関数」の値及び微分値を計算する段階と、
  - (5)複数の吸収線について前記(4)の結果を前記(3)の結果に足し合わせる段階と
  - (6)前記(5)の結果を補間して前記第2の所定の間隔より狭い間隔で関数値及び微分値を計算する段階と、
  - (7)前記第2の範囲において複数の吸収線について「フォークト関数と前記第2の3 次関数の差の関数」の値を前記(6)の結果に足し合わせる段階と、 を有する方法。
- [2] (補正後)(8)最小単位の間隔になるまで間隔を狭めながら補間により関数値、微分値を計算する段階を繰り返す請求項1に記載の方法。
- [3] (補正後)前記(6)の段階における「前記第2の所定の間隔より狭い間隔」が第3の

所定の間隔になるまで前記(4)ないし(6)に記載された段階を1回以上繰り返す請求 項1に記載の方法。

[4] (補正後)前記所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項1に記載の方法。 前記第1の所定の間隔は、j<sup>kmax</sup>d v である。ここで、jは1桁の自然数、d v は波数の 増分、kmaxは、j<sup>kmax+2</sup>pd v ≤ Vmax

を満たす自然数である。ただし、Vmax は 吸収線中心からの計算範囲で最大のもの、pは計算精度を制御する自然数である。

- [5] (補正後)前記所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項3に記載の方法。 第3の所定の間隔は、 $j^{kmin}d\nu$  である。ここで、jは1桁の自然数、 $d\nu$  は波数の増分、kminは、 $j^{kmin}$ pd $\nu \le \alpha$  ( $\alpha$ は $\gamma$  / 4程度)を満たす最大の非負の整数である。ただし、 $\gamma$  は吸収線の半値幅の近似値、pは計算精度を制御する自然数である。
- [6] (補正後)前記第2の所定の間隔は以下の式を用いて決定する請求項1に記載の方法。

第k-kmin+1番目に狭い幅の所定の間隔は、j<sup>k</sup>d $\nu$ である。ここで、jは1桁の自然数、 $d\nu$ は波数の増分、kはkmin $\leq k$ <kmaxである。kmaxは、j<sup>kmax+2</sup>pd $\nu$  $\leq V$ maxを満たす自然数である。ただし、Vmaxは吸収線中心からの計算範囲で最大のもの、pは計算精度を制御する自然数である。kminは、j<sup>kmin</sup>pd $\nu$  $\leq <math>\alpha$ ( $\alpha$ は $\gamma$ /4程度)を満たす最大の非負の整数である。ただし、 $\gamma$ は吸収線の半値幅の近似値、pは計算精度を制御する自然数である。

[7] (補正後)前記補間は、補間区間を4等分し、補間区間 $(x_0, x_1)$ において4分割する点の関数値を $y_x, y_b, y_c$ 、およびその微分値を $y_a', y_b', y_c'$ とし、 $x_0, x_1$ での関数値  $y_0, y_1$ 及び関数微分値 $y_0', y_1'$ を用いて、以下の(1)式は関数値の補間式、(2)式は 関数微分値の補間式、 $\varepsilon$  を非負の小数として計算する請求項1ないし3のいずれかに記載の方法。

$$\begin{pmatrix} y_a \\ y_b \\ y_c \end{pmatrix} = \frac{1}{64} \begin{pmatrix} 54 - 6\varepsilon & 10 + 6\varepsilon & 9(1 - \varepsilon) & -3(1 - \varepsilon) \\ 32 & 32 & 8(1 - \varepsilon) & -8(1 - \varepsilon) \\ 10 + 6\varepsilon & 54 - 6\varepsilon & 3(1 - \varepsilon) & -9(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0)y_0' \\ (x_1 - x_0)y_1' \end{pmatrix}$$
(1)

$$\begin{pmatrix} y_a' \\ y_b' \\ y_c' \end{pmatrix} = \frac{1}{16(x_1 - x_0)} \begin{pmatrix} -18 + 2\varepsilon & 18 - 2\varepsilon & 3(1 - \varepsilon) & -5(1 - \varepsilon) \\ -24 + 8\varepsilon & 24 - 8\varepsilon & -4(1 - \varepsilon) & -4(1 - \varepsilon) \\ -18 + 2\varepsilon & 18 - 2\varepsilon & -5(1 - \varepsilon) & 3(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ (x_1 - x_0) y_0' \\ (x_1 - x_0) y_1' \end{pmatrix}$$
(2)

[8] (補正後)前記補間は、補間区間を5等分し、補間区間 $(x_0, x_1)$ において5分割する点の関数値を $y_x, y_b, y_c, y_d$ 、およびその微分値を $y_a', y_b', y_c', y_d'$ とし、 $x_0, x_1$ での関数値 $y_0, y_1$ 及び関数微分値 $y_0', y_1'$ を用いて、以下の(3)式は関数値の補間式、(4)式は関数微分値の補間式、 $\varepsilon$  を非負の小数として計算する請求項1ないし3のいずれかに記載の方法。

$$\begin{pmatrix} y_{\alpha} \\ y_{b} \\ y_{c} \\ y_{d} \end{pmatrix} = \frac{1}{125} \begin{pmatrix} 112 - 12\varepsilon & 13 + 12\varepsilon & 16(1 - \varepsilon) & -4(1 - \varepsilon) \\ 81 - 6\varepsilon & 44 + 6\varepsilon & 18(1 - \varepsilon) & -12(1 - \varepsilon) \\ 44 + 6\varepsilon & 81 - 6\varepsilon & 12(1 - \varepsilon) & -18(1 - \varepsilon) \\ 13 + 12\varepsilon & 112 - 12\varepsilon & 4(1 - \varepsilon) & -16(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{0} \\ y_{1} \\ (x_{1} - x_{0})y_{0}' \\ (x_{1} - x_{0})y_{1}' \end{pmatrix}$$
(3)

$$\begin{pmatrix} y_{\sigma}' \\ y_{b}' \\ y_{d}' \\ y_{d}' \end{pmatrix} = \frac{1}{25(x_{1} - x_{0})} \begin{pmatrix} -24 - \varepsilon & 24 + \varepsilon & 8(1 - \varepsilon) & -7(1 - \varepsilon) \\ -36 + 11\varepsilon & 36 - 11\varepsilon & -3(1 - \varepsilon) & -8(1 - \varepsilon) \\ -36 + 11\varepsilon & 36 - 11\varepsilon & -8(1 - \varepsilon) & -3(1 - \varepsilon) \\ -24 - \varepsilon & 24 + \varepsilon & -7(1 - \varepsilon) & 8(1 - \varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{0} \\ y_{1} \\ (x_{1} - x_{0}) y_{0}' \\ (x_{1} - x_{0}) y_{1}' \end{pmatrix}$$
(4)

[9] (補正後)フォークト関数をK(x,y)とし、吸収線のフォークト線形からずれた吸収線の 形がK(x,y)+f(x)であるとき、

K(x, y)

を

$$\widetilde{K}(x,y) = AK(x,y) + Bf(x),$$

찯

$$\frac{\partial \widetilde{K}(x,y)}{\partial x} = A \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} + B \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによってライン・バイ・ライン計算を高速化する請求項1ないし8に記載の方法。

[10] (補正後)フォークト関数をK(x,y)とし、フォークト線形からずれた吸収線の形が K(x,y)f(x)がであるとき、

K(x, y)

を

$$\widetilde{K}(x,y)=K(x,y)f(x).$$

$$\frac{\partial K(x,y)}{\partial x}$$

を

$$\frac{\partial \widetilde{K}(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} f(x) + K(x,y) \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

で置き換えることによってライン・バイ・ライン計算を高速化する請求項1ないし8に記載の方法。

[11] (補正後)サブローレンツィアン補正について、

$$\widetilde{K}(x, y) = K(x, y) A \exp(-B|x|)$$

および

$$\frac{\partial \tilde{K}(x,y)}{\partial x} = \frac{\partial K(x,y)}{\partial x} A \exp(-B |x|) + K(x,y) \left[-\operatorname{sgn}(x)AB \exp(-B |x|)\right]$$

を利用してライン・バイ・ライン計算を高速化する請求項10に記載の方法。

[12] (補正後)ラインミキシング補正について、以下に表す式で置き換えることによってラ

イン・バイ・ライン計算を高速化する請求項9に記載の方法。

を

$$\widetilde{K}(x,y) = AK(x,y) + BL(x,y)$$

$$\frac{\partial K(x,y)}{\partial x}$$

を

$$\frac{\partial \widehat{K}(x,y)}{\partial x} = -2\left[ (Ax + By)K(x,y) - (Ay - Bx)L(x,y) - \frac{B}{\sqrt{\pi}} \right].$$

ここでL(x,y)は次式で定義される、複素数z=x+iyの関数w(z)の虚数成分である(実数部分はフォークト関数)。

$$w(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z - t} dt = \exp(-z^2) \operatorname{erfc}(-iz) = K(x, y) + iL(x, y)$$

(erfc(z)は複素相補誤差関数)

- [13] (補正後)多数の重なり合う吸収線のライン・バイ・ライン計算の高速化プログラムであって、該プログラムは、
  - (1)吸収線の形状を表わすフォークト関数の対象範囲を、フォークト関数のピーク近傍の第1の範囲および第1の範囲に含まれない裾部分に分けて、第1の範囲を、前記フォークト関数との接続点において、前記フォークト関数と関数の値及び微分値が一致する3次関数で代替し、第1の所定の間隔ごとに該3次関数と裾部分のフォークト関数の値及び微分値を計算する段階と、
  - (2)複数の吸収線について前記(1)の結果を足し合わせる段階と、
  - (3)前記(2)の結果を補間して前記第1の所定の間隔より狭い第2の所定の間隔で 関数値及び微分値を計算する段階と、

- (4)前記第1の範囲をピーク近傍の第2の範囲と第2の範囲に含まれない裾部分に分けて、「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の該第2の範囲を、前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」との接続点において、前記「フォークト関数と前記3次関数の差の関数」の関数の値及び微分値が一致する第2の3次関数で代替し、前記第2の所定の間隔ごとに該第2の範囲を代替した該第2の3次関数と裾部分の該「フォークト関数と前記第2の3次関数の差の関数」の値及び微分値を計算する段階と、
- (5)複数の吸収線について前記(4)の結果を前記(3)の結果に足し合わせる段階と
- (6)前記(5)の結果を補間して前記第2の所定の間隔より狭い間隔で関数値及び微分値を計算する段階と、
- (7)前記第2の範囲において複数の吸収線について「フォークト関数と前記第2の3 次関数の差の関数」の値を前記(6)の結果に足し合わせる段階と、 を有するプログラム。
- [14] (補正後)最小単位の間隔になるまで間隔を狭めながら補間により関数値、微分値を計算する段階を繰り返す請求項13に記載のプログラム。
- [15] (補正後)前記(6)の段階における「前記第2の所定の間隔より狭い間隔」が第3の 所定の間隔になるまで前記(4)ないし(6)に記載された段階を1回以上繰り返す請求 項13に記載のプログラム。

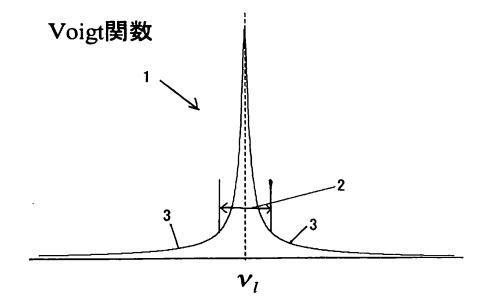
#### 条約19条に基づく説明書

PCT19条(1)の規定基づく補正並びにその補正が明細書及び図面に与えることのある影響について以下に説明します。国際調査機関の見解書では1~10の項目についてそれぞれ見解が述べられていますので、各項目に対応させて説明します。

- 1. 請求項1、13では「第2の所定の間隔」は「第1の所定の間隔」より 狭い間隔であることを明確にし、(4)の3次関数は第2の範囲を代替するもの であることを明確にしました。吸収線とライン・バイ・ライン計算との関係に 関しては、本願明細書に記載されているように、放射伝達計算をする際に多数 の重なり合う吸収線に対してライン・バイ・ライン計算が行われます。これは 当業者であれば容易に理解できます。
- 2. 請求項3、15に関しては、参照する請求項の(4)においてピーク近傍の第2の範囲を第2の3次関数で近似し、この第2の3次関数に関連した数値を第2の間隔で計算します。(5)ではこの値を(3)の値に加えます。次に(6)において(5)の結果を補間して第2の間隔より小さい間隔で関数値および微分値を計算します。この第2の間隔より小さい間隔で計算した値に対して再び(4)の計算を行います。このときピーク近傍の第2の範囲は前回の(4)の第2の範囲より小さい値となるため、このプロセスを繰り返すことによって「第2の間隔より狭い間隔」が少しずつ小さくなります。これによって第3の所定の間隔になります。
- 3. 請求項4、6に対しては、サブ関数に関する部分を削除しました。
- 4. 請求項5の「γ/4程度」との記載は当業者であれば十分理解できる範囲であるので補正していません。
- 5. 請求項6の記載に関しては「kmin」、「kmax」の定義を記載しました。
- 6. 請求項7、8の記載に関しては「jを4として」、「jを5として」の記載を削除し、さらに $y_a$ 、 $y_b$ 、 $y_e$ 、 $y_d$ 、の意味が明確になるように補正しました。
- 7. 請求項9-12の記載に関して、「ライン・バイ・ライン計算を高速化す

- る」と補正して意味を明確にしました。
- 8. 請求項9-10の記載に関しては明細書の記載から当業者であれば明確に理解できます。
- 9. 請求項11については従属する請求項を請求項10としました。
- 10 請求項11、12が従属する請求項をそれぞれ請求項10、9としました。

[図1]



[図2]

